

# Nova metodologia para síntese de organoselenilalquinos terminais

Bianca T. Dalberto<sup>1</sup> (IC), Eric F. Lopes<sup>1</sup> (PG), Eder J. Lenardão<sup>1</sup> (PQ)\*

<sup>1</sup>Universidade Federal de Pelotas (UFPel, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos - LASOL - UFPel - 96010-900 Pelotas – Brasil

\*lenardao@ufpel.edu.br

Palavras Chave: Alquino, Arilselenilalquino, Selênio

## Abstract

### Novel methodology for the synthesis of terminal organoselenyl alkynes

A novel, simple and efficient methodology to achieve organoselenyl alkynes via Retro-Favorskii reaction. Several differently substituted terminal alkynyl selenides were selectively prepared from the respective carbinolic alkynyl selenides in good yields.

## Introdução

Moléculas orgânicas que contêm átomos de selênio em sua estrutura despertam grande interesse em síntese orgânica, afinal, podem apresentar atividades biológicas como anti-oxidante<sup>1</sup> e, ainda, podem ser utilizadas como importantes intermediários sintéticos.<sup>2</sup> Desta maneira, selenilalquinos terminais são uma classe de interesse em síntese orgânica, pois por possuírem um átomo de selênio vizinho a uma ligação tripla terminal,<sup>3</sup> eles são susceptíveis a diversas funcionalizações, podendo atuar como intermediários na síntese de diversos compostos.<sup>4</sup> Assim, o desenvolvimento de metodologias simples e eficientes para a obtenção de selenilalquinos é de grande interesse, uma vez que há certas limitações nas rotas sintéticas já presentes na literatura para obtenção desses compostos.<sup>5</sup>

## Resultados e Discussão

A otimização reacional foi iniciada utilizando 1 mmol do composto **1a** e foram variados alguns parâmetros, tais como base, tempo reacional, solvente e estequiometria, como pode ser observado na Tabela 1.

Ao processar a reação utilizando 1 mmol de KOH, em hexano, à temperatura ambiente, o composto **2a** foi obtido com 30% de rendimento (Tab. 1, linha 1). Quando a reação foi realizada a 50 °C, **2a** foi obtido em 90% de rendimento (Tab. 1, linha 2). Deste modo, mantendo a temperatura a 50 °C e variando a quantidade de KOH entre 1,2 e 2,0 mmol (Tab. 1, linhas 4-6), verificou-se que usando 1,2 mmol de KOH obtém-se 90% do produto **2a**, mostrando que apenas 1,0 mmol de KOH é necessário para promover a reação de forma satisfatória. Além disso, quantidades superiores de base levam à decomposição do produto **2a**.

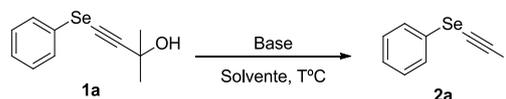


Tabela 1. Otimização das condições reacionais.<sup>a</sup>

#	Base (mmol)	Solv. (mL)	T (°C)	Tempo (h)	Rend. %
1	KOH (1)	Hexano	T.a	1	30
2	KOH (1)	Hexano	50	1	90
3	KOH (1)	Hexano	Reflux.	1	54
4	KOH (1.2)	Hexano	50	1	90
5	KOH (1.5)	Hexano	50	1	79
6	KOH (2)	Hexano	50	1	53
7	KOH (1)	Hexano	50	2	75
8	NaOH(1)	Hexano	50	1	50
9	KOH (1)	Éter de Petróleo	50	1	23

<sup>a</sup>Reações realizadas utilizando selenoalquino **1a** (1 mmol) e base em 3 mL de solvente, com filtração em silicagel, sem extração prévia.

A fim de avaliar o tempo reacional, a reação foi processada durante 2 h a 50°C, utilizando 1,0 mmol de KOH, entretanto, o rendimento caiu para 75% (Tab.1, linha 7). Para avaliar o comportamento de outra base, foi utilizado NaOH, porém o produto foi obtido em apenas 50% de rendimento (Tab. 1, linha 8). Finalmente, éter de petróleo foi utilizado como solvente da reação e o produto foi obtido em 23% de rendimento. Deste modo, a linha 2 foi eleita como a melhor condição reacional para a síntese de **2a**, a qual foi utilizada para obtenção de diferentes selenilalquinos terminais **2b-d** (Figura 1).

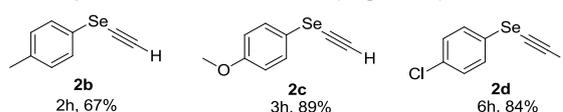


Figura 1. Selenilalquinos terminais sintetizados.

## Conclusões

Foi desenvolvida uma metodologia simples e eficiente para a obtenção de arilselenilalquinos, a qual foi validada para utilização de substratos arila e estudos continuam para a validação da metodologia para utilização em substratos alquila.

## Agradecimentos

CNPq, FAPERGS, CAPES e UFPel.

<sup>1</sup>Nogueira, C. W.; Zeni, G.; Rocha, J. B. T. *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 6255.  
<sup>2</sup>Lang, H.; Keller, H.; Imnhof, W.; Martin, S. *Chem. Ber.* **1990**, *123*, 417.  
<sup>3</sup>Potapov, V. A.; Trofimov, B. A. *Science of Synthesis*, **2014**, *4*, 957.  
<sup>4</sup>Rampon, D. S.; Giovenardi, R.; Silva, T. L.; Rambo, R. S.; Merlo, A. A.; Schneider, P. H. *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, *2011*, 7066.  
<sup>5</sup>Bieber, L. W.; Silva, M. F.; Menezes, P. H. *Tetrahedron Letters*, **2004**, *45*, 2735.